



ANÁLISE E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE DIÁLISE VIA MÉTODO DOS
ELEMENTOS FINITOS

Gilli Martins, J.C.

Meyer, J.F.C.A.

DMA - IMECC /UNICAMP - C.P. 6065
13081 - CAMPINAS, SP

ANÁLISE E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE DIÁLISE VIA MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Gilli Martins, J.C.

Meyer, J.F.C.A.

DMA - IMECC /UNICAMP - C.P. 6065
13081 - CAMPINAS, SP

1. O PROBLEMA

O rim humano é a principal via de eliminação de impurezas do sangue, dentre as quais podemos destacar a uréia, o ácido úrico e a creatinina [15].

Quando o rim falha na execução desta sua função, uma alternativa é retirar o sangue do corpo humano, passá-lo através de um rim artificial, onde estas impurezas são removidas e, então, reintroduzi-lo no corpo humano, [9] e [15].

Tal alternativa para a filtração de impurezas no sangue pode ser obtida usando-se membranas sintéticas — este procedimento é denominado hemodiálise extracorpórea, ou, simplesmente, diálise. A filtração se dá pelo bombeamento vertical do sangue através de capilares imersos em um recipiente cilíndrico, contendo soro dialisador que é bombeado, também verticalmente, através do recipiente, no sentido contrário ao do fluxo do sangue. Este soro é renovado continuamente. As impurezas atravessam a membrana semi-permeável que reveste cada capilar. Esta técnica baseia-se, então, num processo de difusão radial — através desta membrana semi-permeável — e de advecção longitudinal [9].

Este trabalho objetiva analisar e simular numericamente este processo sob condições diversas como troca de membrana, alteração de velocidade de fluxo (i.e.: do bombeamento) ou alteração da concentração do soro dialisador, e comparar os resultados obtidos através dos métodos de Galerkin "Standard" e Petrov-Galerkin [6], [10], [12].

2. O MODELO

Com o objetivo de encontrar uma equação matemática que descreva um modelo de funcionamento da diálise, recorreremos à equação geral do transporte dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \text{div}(J) = f \quad (2.1)$$

onde $C \equiv C(r, \theta, z)$ denota a concentração de impurezas no sangue; J denota o fluxo de sangue e f representa a fonte ou o sorvedouro [7], [14].

Neste problema, o sistema funciona em regime estacionário, logo $\frac{\partial C}{\partial t} \equiv 0$. Por outro lado, durante o fenômeno de transporte não ocorrem produção nem consumo de impurezas no sangue; daí $f \equiv 0$. Resulta, então, que (2.1) se restringe a

$$\text{div}(J) = 0 \quad (2.2)$$

Como o fenômeno de transporte, no interior de cada capilar do dialisador, se dá por difusão através da membrana semi-permeável, e por advecção longitudinal, denotando por F o fluxo por difusão e por T o fluxo por advecção, temos:

$$J = F + T$$

e

$$\text{div}(J) = \text{div}(F) + \text{div}(T) \quad (2.3)$$

Analisando a geometria do meio onde ocorrem estes fenômenos — supondo o fluxo laminar e por força da simetria axial —, temos que $\text{div}(J)$ se resume a uma função nas variáveis r e z , definida em $\Omega = [0, R] \times [0, L]$, onde R e L denotam,

respectivamente, o raio e o comprimento de cada capilar, como mostra a figura abaixo

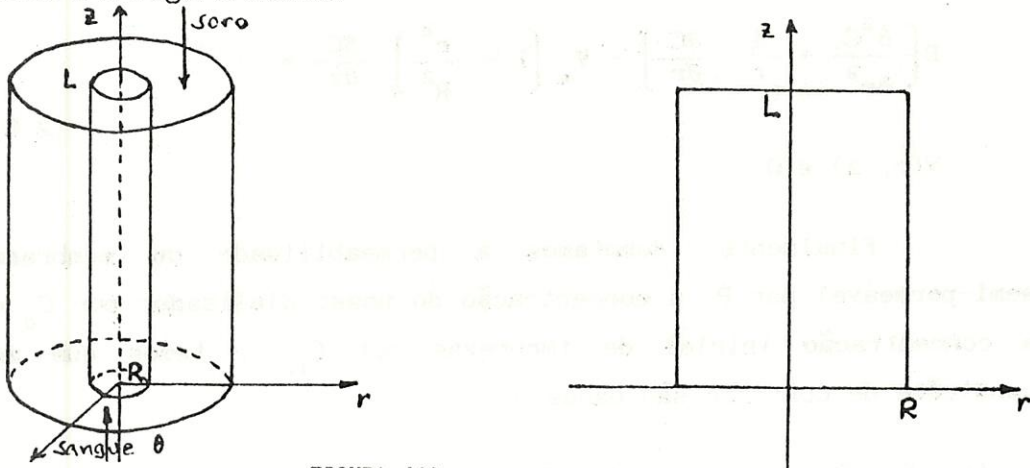


FIGURA (1)

Nestas condições, denotando por D o coeficiente de difusão, deduz-se

$$\text{div} (F) = \text{div} (-D\nabla C) = -D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right]$$

Como a advecção, na direção do eixo- z , se sobrepõe, quase que absolutamente, à difusão nesse mesmo sentido [9], podemos tomar, na expressão acima, $D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \equiv 0$. Desse modo temos:

$$\text{div} (F) = -D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right] \quad (2.4)$$

Recorrendo à Lei de Poiseuille [2], [7], [9], [14], para modelar o perfil da velocidade na direção do eixo- z , temos:

$$\text{div} (T) = V_m \left[1 - \frac{r^2}{R^2} \right] \frac{\partial C}{\partial r} \quad (2.5)$$

onde V_m denota a velocidade média do sangue.

De (2.4) e (2.5) resulta

$$\text{div} (J) = -D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right] + V_m \left[1 - \frac{r^2}{R^2} \right] \frac{\partial C}{\partial z}$$

ou ainda

$$D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right] - V_m \left[1 - \frac{r^2}{R^2} \right] \frac{\partial C}{\partial z} =$$

(2.6)

$$V(r, z) \in \Omega$$

Finalmente, denotamos a permeabilidade da membrana semi-permeável por P , a concentração do nosso dialisador por C_d e a concentração inicial de impurezas por C_{in} , temos que as condições de contorno são dadas por:

$$(i). C = C_{in}, \quad z = 0 \text{ e } 0 \leq r \leq R$$

$$(ii). -D \frac{\partial C}{\partial r} = P (C - C_d), \quad V = R \text{ e } 0 \leq Z \leq L \quad (\text{Lei de Fick})$$

$$(iii). \frac{\partial C}{\partial z} = 0, \quad z = L \text{ e } 0 \leq r \leq R \quad (\text{Imposição do Problema})$$

$$(iv). \frac{\partial C}{\partial z} = 0, \quad z = L \text{ e } 0 \leq r \leq R \quad (\text{Simetria axial})$$

3. A FORMULÇÃO VARIACIONAL

Tendo em vista que o problema de valor de contorno (2.6) é um problema de aveccão - difusão do tipo parabólico, com ênfase num ou noutro dependendo da relação entre os coeficientes do problema e sua descritização, iremos abordá-lo, primeiro, através do Método de Galerkin "Standard" e, em seguida, através do Método de Petrov-Galerkin.

Antes disso, como (2.6) está expressa em coordenadas cilíndricas, precisamos submeter a sua formulação clássica generalizada à mudança de coordenadas dada por:

$$\begin{cases} x = r \cos \theta \\ y = r \sin \theta \end{cases},$$

cujo Jacobiano é r .

Nestas condições, escolhendo como o espaço de trabalho $H^1(\Omega)$, e, nele, tomando o subespaço

$$V = \left\{ v \in H^1(\Omega); \quad \frac{\partial v}{\partial n} \Big|_{r=0} = 0 \quad e \quad \frac{\partial v}{\partial n} \Big|_{z=L} = 0 \right\} \quad (3.1)$$

temos:

3.1 O MÉTODO DE GALERKIN "STANDARD"

Neste caso, o problema se resume em encontrar $c \in V$ tal que, para todo $v \in V$, temos

$$\begin{aligned} & \left[D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) - V_m \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \Big| V \right] = \\ & D \left[r \frac{\partial C}{\partial r} \Big| \frac{\partial V}{\partial r} \right] + V_m \left[\left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \Big| V \right] + \\ & + PR \int_0^L C v dz + PRCd \int_0^L v dz \end{aligned} \quad (3.2)$$

3.2 O MÉTODO DE PETROV-GALERKIN

Tendo em vista que (2.6) apresenta um termo de advecção na direção do eixo-z, dado por $V_m \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z}$, e uma advecção artificial na direção do eixo-r, dado por $\frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r}$, aplicaremos o Método de Petrov-Galerkin nestas duas direções. Para isto induziremos uma difusão artificial na direção do eixo-z, acrescentando em (2.6) o termo $\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$.

Nestas condições o problema torna-se o de encontrar $C \in V$ tal que, para todo $v \in V$, temos:

$$\begin{aligned}
 & \left[D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) - V_m \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \right] V + \\
 & + \delta V_m \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial V}{\partial z} + \lambda \frac{\partial V}{\partial r} \Bigg] = \\
 & - D \left[r \frac{\partial C}{\partial r} \Bigg| \frac{\partial V}{\partial r} \right] - \delta V_m^2 \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \Bigg| \frac{\partial V}{\partial z} \right] + \\
 & + D \delta V_m \left[\left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial r} \Bigg| \frac{\partial C}{\partial z} \right] - V_m \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \Bigg| V \right] + \\
 & + \lambda D \left[\frac{\partial C}{\partial r} \Bigg| \frac{\partial C}{\partial r} \right] - \lambda V_m \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \Bigg| \frac{\partial V}{\partial r} \right] - \\
 & - PR \int_0^L C v dz + PR \int_0^L v dz \tag{3.3} \\
 & \qquad \qquad \qquad r=R \qquad \qquad \qquad r=R
 \end{aligned}$$

4 DISCRETIZAÇÃO

Em primeira aproximação, optamos por uma triangulação uniforme do Ω , obtendo o conjunto de triângulos disjuntos

$$T_h = \left\{ \Omega_h \right\}_{h=1}^N \quad \text{tais que}$$

$$\Omega = \bigcup_{h=1}^N \Omega_h$$

como mostra a figura (2):

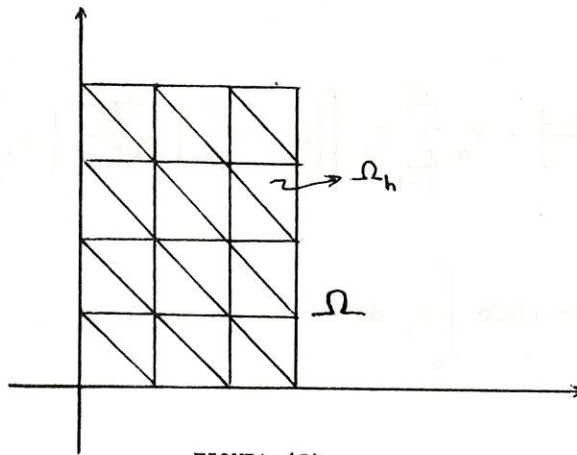


FIGURA (2)

Seja $V_h \subset V$ o subespaço de dimensão finita de V dado por:

$$V_h = \left\{ v_h \in V; v_h \in C^0 \text{ em } \Omega \text{ e } v_h \Big|_{\Omega_h} \text{ é linear} \right\} \quad (4.1)$$

A definição de V_h induz à escolha de uma base $\beta = \{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$, onde N é o número de nós da malha, tal que, para $j = 1, 2, \dots, N =$

$$(i). \quad \varphi_1(r_j, z_j) = \delta_{1j}$$

$$(ii). \quad \varphi_1 \text{ é linear em cada } \Omega_h$$

Nestas condições, a aproximação C_h que minimizar o potencial associado ao problema (2.6) está em $V_h \subset V$, e será representada por

$$C_h = \sum_{j=1}^N C_j \varphi_j$$

Assim, o problema (2.6) resume-se em encontrar $C_h = (C_1, \dots, C_N)$ em V_h tal que, para todo $\varphi_1 \in V_h$, $i = 1, 2, \dots, N$:

4.1. NO MÉTODO DE GALERKIN "STANDARD":

$$D \sum_{j=1}^N C_j \left[r \frac{\partial \varphi_j}{\partial r} \mid \frac{\partial \varphi_1}{\partial r} \right] + v_m \sum_{j=1}^N C_j \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial \varphi_j}{\partial r} \mid \varphi_1 \right] +$$

$$+ PR \sum_{j=1}^{NF} C_j \int_0^L \varphi_j \varphi_1 dz = PRcd \int_0^L \varphi_1 dz$$

4.2. NO MÉTODO DE PETROV-GALERKIN:

$$D \sum_{j=1}^N C_j \left[r \frac{\partial \varphi_j}{\partial r} \mid \frac{\partial \varphi_1}{\partial r} \right] + D \sum_{j=1}^N C_j \left[\frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \mid \frac{\partial \varphi_1}{\partial z} \right] +$$

$$+ \delta v_m^2 \sum_{j=1}^N C_j \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \mid \frac{\partial \varphi_1}{\partial z} \right] -$$

$$- D \delta v_m \left[\left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial \varphi_j}{\partial r} \mid \frac{\partial \varphi_1}{\partial z} \right] +$$

$$+ v_m \sum_{j=1}^N C_j \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \mid \varphi_1 \right] - \lambda D \sum_{j=1}^N C_j \left[\frac{\partial \varphi_j}{\partial r} \mid \frac{\partial \varphi_1}{\partial r} \right] +$$

$$+ \lambda v_m \sum_{j=1}^N C_j \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \mid \frac{\partial \varphi_1}{\partial r} \right] + PR \sum_{j=1}^{NF} C_j \int_0^L \varphi_j \varphi_1 dz =$$

$$= PRcd \int_0^L \varphi_1 dz$$

5. EXISTÊNCIA E UNICIDADE DA SOLUÇÃO

Estabelecido o espaço de trabalho

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega); \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega); \text{ com } i = 1, 2, \dots, n \right\}$$

definamos, sobre ele, o produto interno usual. A norma em $H^1(\Omega)$, introduzida por este produto interno é definida por:

$$\| v \|_{H^1(\Omega)}^2 = \| v \|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{i=1}^n \left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)}^2, \quad \forall v \in H^1(\Omega)$$

Desse modo, $H^1(\Omega)$ é um espaço de Hilbert. O subespaço $V \subset H^1(\Omega)$ é, também, um espaço de Hilbert, com a norma de $H^1(\Omega)$ induzida sobre ele.

Com estas considerações, denotando-se A, L e B por:

$$A(C, v) = D \left[r \frac{\partial C}{\partial r} \mid \frac{\partial v}{\partial r} \right] - V_m \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \mid v \right] + PR \int_{r=R}^L cvdz$$

$$L(v) = PRCd \int_{r=R}^L vdz$$

e

$$B(C, v) = D \left[r \frac{\partial C}{\partial r} \mid \frac{\partial v}{\partial r} \right] + D \left[\frac{\partial C}{\partial z} \mid \frac{\partial v}{\partial z} \right] +$$

$$+ \delta V_m^2 \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \mid \frac{\partial v}{\partial z} \right] - D \delta V_m \left[\left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial r} \mid \frac{\partial v}{\partial z} \right] +$$

$$\begin{aligned}
& + V_m \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_v \right] - \lambda D \left[\frac{\partial C}{\partial r} \Big| \frac{\partial v}{\partial r} \right] + \\
& + \lambda V_m \left[\left(r - \frac{r^3}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \Big| \frac{\partial v}{\partial r} \right] + PR \int_0^L cvdz, \\
& \qquad \qquad \qquad r=R
\end{aligned}$$

verifica-se que tanto A quanto B constituem-se em formas bilineares, contínuas e coercivas sobre V. Por outro lado, L é uma forma linear contínua sobre V.

Nestas condições, pelo teorema de Lax-Milgram [4], [5], [11] e [13], podemos afirmar que existe um único $C \in V$ e um único $\bar{C} \in V$ tal que

$$A(C, v) = L(v) \quad , \quad \forall v \in V$$

e

$$B(\bar{C}, v) = L(v) \quad , \quad \forall v \in V$$

Desse modo, ficam garantidas existência e unicidade de solução tanto com respeito ao Método de Galerkin "Standard" quanto com respeito ao Método de Petrov-Galerkin.

6. ESTIMATIVA DE ERRO E RESULTADO NUMÉRICOS

Usando a metodologia usual, são oferecidas estimativas de erro e resultados Numéricos serão fornecidos. Gráficos construídos a partir destes resultados foram preferidos pela facilidade de visualização — e são apresentados a seguir.

Embora os parâmetros sejam aproximadamente correspondentes aos da diálise efetiva, as dimensões do aparelho foram escolhidas de modo a permitir a execução dos programas num ambiente PC-AT do LABMA (Laboratório de Matemática Aplicada do Depto. de Matemática Aplicada) da UNICAMP.

7. BIBLIOGRAFIA

- [1] AKIN, J.E. — Finite Element Analysis for undergraduates.
- [2] BASSANEZI, R.C. e FERREIRA JR, W.C. — Equações Diferenciais com Aplicações.
- [3] CAREY, G.F. e ODEN, J.T. — The Texas Finite Element Series, Volumes I, II, III, e VI, Printice Hall, 1981.
- [4] CEA, J. — Optimisation: théorie et algorithmes, Dunod, Paris 1971.
- [5] CIARLET, P.G. — The Finite Element Method for Elliptic Problems, North-Holland, 1979.
- [6] CLAES, J. — Numerical solution of partial differential equations by the finite element method.
- [7] CRANK, J. — The Mathematics of Diffusion, 2nd edition, Clarendon Press - Oxford.
- [8] EBEL, W. — Carrier facilitated difusion, Journal of Mathematical Biology, (1985) 21:243-271
- [9] KAPUR, J.N. — Mathematical Models in Medical Sciences, Int. Journal of Mathematical Education in Science and Technology, vol. 15, n.º 5 (84), 587-600.
- [10] KARDESTUNCER, H. — Finite Element Handbook.
- [11] MEDEIROS, L.A. & MIRANDA, M.M. — Introdução aos Espaços de Sobolev e as Equações Diferenciais Parciais, Rio de Janeiro - 1989.
- [12] MEYER, J.F.C.A., GRISOTTO, M.E. e MENDES, M.L.G. — Modelo para Difusão num Rim Artificial, Anais do X CNMAC, 1987.
- [13] MOURA, C.A. — Elementos Finitos e aplicações à mecanica dos fluidos: Análise Funcional - um roteiro, V Escola de Matemática Aplicada, Rio de Janeiro - 1989.
- [14] MURRAY, J.D. — Mathematical Biology, Springer Verlag, 1989.
- [15] NISSENSON, A.R.; FINE, R.N. e GENTILE, D.E. — Clinical Dialysis - 2nd edition.
- [16] RUBINOW, S.I. — Introduction to Mathematical Biology. A Wiley-Interscience Publication, John Wiley & Sons, New York, 1974.